



TITLE:

一次元量子系に対するエネルギー準位統計(筑波大学開学20周年記念第2回『非平衡系の統計物理-現状と展望』シンポジウム,研究会報告)

AUTHOR(S):

南, 就将

CITATION:

南, 就将. 一次元量子系に対するエネルギー準位統計(筑波大学開学20周年記念第2回『非平衡系の統計物理-現状と展望』シンポジウム,研究会報告). 物性研究 1994, 62(1): 160-163

ISSUE DATE:

1994-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/95293>

RIGHT:

一次元量子系に対するエネルギー準位統計

筑波大学数学系 南 就将

$0 \equiv x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} \equiv 1$ を $(0, 1)$ 内の任意の点の配列とし, $x = 0, 1$ における Dirichlet 条件の下で次のような Schrödinger 作用素を考える:

$$H_v(\hbar) = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} + v \sum_{j=1}^n \delta(x - x_j)$$

ここで $v > 0$ は coupling constant, パラメータ $\hbar > 0$ は Planck 定数の役割を果たす. $\kappa^2 > 0$ が $H_v(\hbar)$ のエネルギー準位であるとは, 方程式 $H_v(\hbar)\psi = \kappa^2\psi$ の解で, $\psi(0) = \psi(1) = 0$, $\psi \not\equiv 0$ なるものが存在することと定義する. このノートでは便宜上 κ^2 がエネルギー準位のとき κ 自身のことを固有値とよぶことにする. $H_v(\hbar)$ の固有値 $\{\kappa_m(v; \hbar)\}_{m=1}^\infty$ の分布状況の統計的な性質を $\hbar \downarrow 0$ の“準古典極限”において調べるのがこの研究の目的である. 結果は次のように述べる事ができる. (数学的な証明の詳細については [1] を見られたい.)

定数 $c > 0$, $0 < a_1 < a_2$ を固定し, $\hbar > 0$, $k = 1, 2, \dots$ に対して

$$\mathcal{A}_k(\hbar) = \{t \in (a_1, a_2) \mid (t, t + c\hbar) \text{ contains exactly } k \text{ eigenvalues}\}$$

という集合を考える. $\mathcal{A}_k(\hbar)$ は互いに overlap しない区間の和になるが, それら区間の長さの和を $|\mathcal{A}_k(\hbar)|$ と記す. いいかえると $|\mathcal{A}_k(\hbar)|$ は $\mathcal{A}_k(\hbar)$ の Lebesgue 測度である.

定理 1. 任意の $c > 0$, 任意の $k = 0, 1, \dots$ に対して, 極限

$$\pi_k(c) = \pi_k(c; x_1, \dots, x_n) \equiv \lim_{\hbar \downarrow 0} \frac{1}{a_2 - a_1} |\mathcal{A}_k(\hbar)|$$

が必ず存在する. 特に $y_j \equiv x_{j+1} - x_j$, $j = 0, 1, \dots, n$ が有理数体上独立¹ならば, $0 < c < 1$ に対して,

$$\pi_k(c) = \sum_{A \subset \{0, \dots, n\}, |A|=k} \prod_{j \in A} \left(\frac{cy_j}{\pi} \right) \prod_{j \in A^c} \left(1 - \frac{cy_j}{\pi} \right)$$

となる. ($c \geq 1$ であっても $\pi_k(c)$ の表式を与えることは難しくないが, 少し見づらくなるのでここでは省略した.)

¹N 個の実数 a_1, \dots, a_N が有理数体上独立とは, $\sum_{j=1}^N m_j a_j = 0$ を成り立たせる整数 m_1, \dots, m_N が $m_1 = \dots = m_N = 0$ に限ることをいう.

系. $y_j \equiv x_{j+1} - x_j$, $j = 0, 1, \dots, n$ は有理数体上独立とする. このとき (a_1, a_2) に含まれる $H_v(\hbar)$ の固有値 $\kappa_m = \kappa_m(v, \hbar)$ のうち, $\kappa_m - \kappa_{m-1} > c\hbar$ を満たすものの相対度数を $\rho_\hbar(c)$ とすると,

$$\rho(c) \equiv \lim_{\hbar \downarrow 0} \rho_\hbar(c) = \left(\prod_{j=0}^n \left(1 - \frac{cy_j}{\pi} \right) \right) \sum_{j=0}^n \frac{y_j}{1 - cy_j/\pi}.$$

特に

$$\rho'(0) \equiv \lim_{c \downarrow 0} \rho_\hbar(c) = \frac{1}{\pi} \left(1 - \frac{1}{\pi} \sum_{j=0}^n y_j^2 \right) > 0.$$

これは $H_v(\hbar)$ の固有値間にいわゆる “level repulsion” が存在しないことを示す.

次に作用素 $H_v(\hbar)$ をランダム化してみる. 即ち X_1, X_2, \dots は $(0, 1)$ 上の一様分布に従う独立な確率変数の列, そして各々の n に対して

$$0 < x_1^{(n)} < \dots < x_n^{(n)} < 1$$

は X_1, \dots, X_n を大きさの順に並べたものとする.

定理 2. 確率 1 で

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \pi_k(c; x_1^{(n)}, \dots, x_n^{(n)}) = e^{-c/\pi} \frac{1}{k!} \left(\frac{c}{\pi} \right)^k, k = 0, 1, \dots$$

即ち $H_v(\hbar)$ がランダムなときその典型的な実現をひとつとると, 固有値の列 $\{\kappa_m(v; \hbar)\}_{m=1}^\infty$ は局所的には Poisson 過程のように見える.

我々が考察したモデル $H_v(\hbar)$ はきわめて単純なものであるが, その研究はおもしろい経過をたどっている.

Pokrovskii ([2]) は $[0, x_{n+1}]$ 上の Schrödinger 作用素

$$L = -\frac{d^2}{dx^2} + v \sum_{j=1}^n \delta(x - x_j)$$

に対する固有値問題を $x = 0, x_{n+1}$ における Dirichlet 条件の下で考えた. 但し

$$0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n < \dots$$

は $(0, \infty)$ 上のランダムな点の配列で, $\ell_j \equiv x_{j+1} - x_j$, $j = 1, 2, \dots$ は定常で相関の弱い確率変数列を成すものとする. さて κ^2 が L のエネルギー準位であるという条件の下で, すぐ上のエネルギー準位が $(\kappa')^2$ と $(\kappa' + d\kappa')^2$ との間にある確率を $Q(\kappa, \kappa')d\kappa'$ とおく. [2] における Pokrovskii の主張は, $\kappa \gg n \gg 1$ するとき

$$Q(\kappa, \kappa') \approx \frac{1}{(\kappa' - \kappa)^2} \exp \left(-\frac{\{(\kappa' - \kappa) - \Delta\kappa\}^2}{\mu n (\kappa' - \kappa)^2} \right)$$

となるというものであった。但し μ はある定数, $\Delta\kappa$ は mean level spacing である。特に $Q(\kappa, \kappa')$ は $\kappa' = \kappa + \Delta\kappa$ において鋭いピークを持ち, $\kappa' \downarrow 0$ とするとき急減少する。いわゆる level repulsion である。(もっとも Pokrovskii 自身はそういう用語を用いていないが。)

$Q(\kappa, \kappa')$ に対する上記の近似式の Pokrovskii による導出は数学的にははっきりしない点の多いものだが, level repulsion の存在だけならば次のように理解することができよう。 L の固有値を $\{\kappa_j\}$ とするとき

$$\kappa_j = \pi j / x_{n+1} + O(1/j x_{n+1}), j \rightarrow \infty$$

なる評価がなりたつことが容易にわかる ([3])。従って大きな固有値 κ_j は“格子点”のまわりに小さなゆらぎを持つにすぎず, 従って互いに接近しえない (level repulsion)。

Pokrovskii の考えた問題は我々の問題と次の2点において異なる。第一に Pokrovskii はランダムな Schrödinger 作用素のアンサンブルを考え, その上で固有値に対する統計を取っているが, 我々はアンサンブル中の典型的な一つの sample を固定した上でその固有値の分布状況を調べているという点である。第2点は考えているエネルギー領域の違いである。 $x = x_{n+1}t$ と変数変換することによって L は $[0, 1]$ 上の作用素

$$\tilde{L} = -\frac{1}{x_{n+1}^2} \frac{d^2}{dx^2} + v \sum_{j=1}^n \delta(t - \frac{x_j}{x_{n+1}})$$

に移る。このことから $\frac{1}{x_{n+1}}$ が Planck 定数 \hbar の役割を果たしていることがわかる。一方 n が大なるとき $x_n \approx n$ だから, κ に対する制限 $\kappa \gg n$ は $\kappa \gg \hbar^{-1}$ に相当する。ところが我々の定理1, 2においては $\kappa \approx \hbar^{-1}$ なるエネルギー領域を考えているのである。

その後15年経って S.A. Molchanov [4] は次のような問題を考えた。 L は先と同じランダム作用素だが, 今度はこれを $x = 0, \ell$ における Dirichlet 条件の下で考える ($\ell \gg 1$)。 $\lambda_j^{(\ell)} = \kappa_j^2$, $j = 1, 2, \dots$ をそのエネルギー準位とするととき Molchanov は次のことを証明した: 任意の $E > 0$, 任意の $a < b$ に対して,

$$\begin{aligned} & \lim_{\ell \rightarrow \infty} P \left(\begin{array}{c} \text{exactly } k \text{ eigenvalues} \\ \text{are contained in } (E + \frac{a}{\ell}, E + \frac{b}{\ell}) \end{array} \right) \\ &= e^{-\nu(E)} \frac{\{\nu(E)(b-a)\}^k}{k!}, \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

但し $\nu(E)$ は energy E における“density of states”という量である。即ち system size が大きいとき, 小さなエネルギー区間にふくまれる準位の数 Poisson 分布に従うというのである。Molchanov は [4] の序文の中で“Pokrovskii の結果はまちがいだ”と述べているが, 実は Molchanov は $\kappa^2 \approx 1$ なるエネルギー領域を考えているのであり, 数学的には全く違う問題を考えているのである。

同じ頃 M. Berry は量子カオスに関する講義 [5] の中で, $H_\nu(\hbar)$ について定理1のような準位統計を取ると, “level repulsion”が見られると論じ, その傍証として Pokrovskii の結果を挙げている。彼は同時に Molchanov の Pokrovskii に対する批判が当を得ないことを指摘しているが, Pokrovskii が考えたエネルギー領域が $\kappa \gg \hbar^{-1}$ であることには注意していないようである。我々の定理1は Berry の意味での準意統計を忠実に定式化してみたものだが, その結果 level repulsion は見られず, むしろ level clustering, あるいは近似的な Poisson 統計が得られたのである。ちなみに Molchanov の結果の中に Poisson 分布が現れるのは全く別の数学的な理由によるものである。

参考文献

- [1] N.Minami: Level repulsion in a one-dimensional finite system. Prog. Theor. Phys. Suppl., to appear
- [2] V. L. Pokrovskii: Distribution function of distances between energy levels of an electron in a one-dimensional random chain. JETP Lett. vol.4 (1966) 96-99
- [3] E.C.Titchmarsh: Eigenfunction expansions associated with second order differential equations, Part I. Oxford University Press, Oxford (1962)
- [4] S.A.Molčanov: The local structure of the spectrum of the one-dimensional Schrödinger operator. Commun. Math. Phys. vol.78 (1981) 429-446
- [5] M.V.Berry: Semiclassical mechanics of regular and irregular motion. in “Chaotic behavior of deterministic systems” ed. by G. Ioos, R.R.G. Helleman, and R. Stora. North-Holland, Amsterdam (1983)